(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum Internationales Büro





(43) Internationales Veröffentlichungsdatum 28. März 2002 (28.03.2002)

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer WO 02/25205 A1

G01B 7/24, (51) Internationale Patentklassifikation7: C09B 47/04, 47/08, 47/26, C01G 51/00

28, 40468 Düsseldorf (DE). KOSTROMINE, Serguei [RU/DE]; Katharinenstr. 28, 53913 Swisstal (DE). OSER, Rafael [DE/DE]; Buschstr. 171, 47800 Krefeld (DE).

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP01/10427

> (74) Gemeinsamer Vertreter: BAYER AKTIENGE-SELLSCHAFT; 51368 Leverkusen (DE).

(22) Internationales Anmeldedatum:

10. September 2001 (10.09.2001)

Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache:

Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:

(25) Einreichungssprache:

100 46 771.1 DE 21. September 2000 (21.09.2000) 101 15 227.2 28. März 2001 (28.03.2001) DE 101 24 585.8 21. Mai 2001 (21.05.2001) DE

- (71) Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme von US): BAYER AKTIENGESELLSCHAFT [DE/DE]; 51368 Leverkusen (DE).
- (72) Erfinder; und
- (75) Erfinder/Anmelder (nur für US): STAWITZ, Josef-Walter [DE/DE]; Am Hagen 1, 51519 Odenthal (DE). BER-**NETH, Horst** [DE/DE]; Erfurter Str. 1, 51373 Leverkusen (DE). BIERINGER, Thomas [DE/DE]; Am Pützchen 25, 51519 Odenthal (DE). BRUDER, Friedrich-Karl [DE/DE]; En De Siep 34, 47802 Krefeld (DE). HAGEN, Rainer [DE/DE]; Damaschkestr. 2a, 51373 Leverkusen (DE). HASSENRÜCK, Karin [DE/DE]; Schlehenweg

- (81) Bestimmungsstaaten (national): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NO, NZ, PH, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG, SI, SK, SL, TJ, TM, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VN, YU, ZA, ZW.
- (84) Bestimmungsstaaten (regional): ARIPO-Patent (GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZW), eurasisches Patent (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches Patent (AT, BE, CH, CY, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE, TR), OAPI-Patent (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

Veröffentlicht:

mit internationalem Recherchenbericht

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.

- (54) Title: OPTICAL DATA STORAGE DEVICE CONTAINING A CO-PHTHALOCYANIN COMPLEX IN THE OPTICALLY WRITABLE INFORMATION LAYER
- (54) Bezeichnung: OPTISCHE DATENSPEICHER ENTHALTEND EIN CO-PHTHALOCYANIN-KOMPLEX IN DER MIT LICHT BESCHREIBBAREN INFORMATIONSSCHICHT
- 02/25205 (57) Abstract: The invention relates to an optical data support which can be written once, to the use of co-phthalocyanin complexes as light-absorbing compounds in the optically writable information layer of optical data supports, especially for CD-Rs, and to the application of the aforementioned compounds to a polymer substrate, especially a polymer carbonate, by spin coating.
 - (57) Zusammenfassung: Die vorliegende Erfindung bezieht sich auf einen einmal beschreibbaren optischen Datenträger unter Verwendung von Co-Phthalocyanin-Komplexen als lichtabsorbierende Verbindungen in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht von optischen Datenträgern, insbesondere für CD-R, sowie die Applikation der oben genannten Verbindungen auf ein Polymersubstrat, insbesondere Polycarbonat, durch Spin-Coating.



Optische Datenspeicher enthaltend ein Co-Phthalocyanin-Komplex in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht

- 1 -

- Die vorliegende Erfindung betrifft die Verwendung von Co-Phthalocyanin-Komplexen als lichtabsorbierende Verbindung in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht von einmal beschreibbaren optischen Datenträgern, optische Datenträger sowie ein Verfahren zu ihrer Herstellung.
- Die einmal beschreibbare Compact Disk (CD-R) erlebt in letzter Zeit ein enormes Mengenwachstum. Dabei stellt die lichtabsorbierende Verbindung der Informationsschicht eine wesentliche Komponente des optischen Datenträgers dar, an die entsprechend hohe und vielfältige Anforderungen gestellt werden. Entsprechend aufwendig gestaltet sich nicht selten die Herstellung solcher Verbindungen (vgl. WO-A-00/09522).

Aufgabe der Erfindung ist demnach die Bereitstellung eines einfach zu synthetisierenden Phthalocyaninfarbstoffs, der die hohen Anforderungen (wie Lichtstabilität, günstiges Signal-Rausch-Verhältnis, hohe Schreibempfindlichkeit, schädigungsfreies Aufbringen auf das Substratmaterial, u.ä.) für die Verwendung als lichtabsorbierende Verbindung in der Informationsschicht eines einmal beschreibbaren optischen Datenträgers (vornehmlich CD-R) erfüllt.

Überraschender Weise wurde gefunden, dass Co-Phthalocyanin-Komplexe für den genannten Zweck gut geeignet sind.

20

30

Die Erfindung betrifft einen optischen Datenträger, enthaltend ein transparentes Substrat, auf dessen Oberfläche mindestens eine beschreibbare Informationsschicht, gegebenenfalls eine Reflexionsschicht, gegebenenfalls Zwischenschichten und/oder gegebenenfalls eine Schutzschicht aufgebracht sind, dadurch gekennzeichnet, dass

die mit Licht beschreibbare Informationsschicht als lichtabsorbierende Verbindung wenigstens einen Co-Phthalocyanin-Komplex der Formel I enthält

$$\stackrel{L^{1}}{\stackrel{\vdash}{Co}} \oplus Pc[R^{3}] \underset{w}{\text{v}} [R^{4}] \underset{x}{\text{v}} [R^{5}] \underset{z}{\text{v}} [R^{6}] \underset{z}{\text{An}} G \qquad (I),$$

5 worin

CoPc für Kobalt-(III)-Phthalocyanin steht, wobei

L¹ und L² axiale, koordinativ gebundene Liganden des Kobalt-Zentralatoms sind und die Reste R³ bis R⁶ Substituenten des Phthalocyanins entsprechen, worin

 L^1 und L^2 unabhängig voneinander für ein Amin der Formel $NR^0R^1R^2$ oder für ein $\bigcirc \ \oplus$ Isonitril der Formel $IC \overline{\equiv} N - R$ steht,

worin

15

20

R⁰, R¹ und R² unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Cycloalkyl, Alkenyl, Aryl oder Hetaryl stehen oder zwei der Reste R⁰ bis R² zusammen mit dem N-Atom, an das sie gebunden sind, einen hydrierten, teilhydrierten, quasi aromatischen oder aromatischen Ring bilden, vorzugsweise einen 5- bis 7-gliedrigen Ring bilden, der gegebenenfalls weitere Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe N, O und/oder S enthält,

25 R für Alkyl, Cycloalkyl, Alkenyl, Aryl oder Hetaryl steht,

R³, R⁴, R⁵ und R⁶ unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Alkyl, Aryl, Alkylamino, Dialkylamino, Alkoxy, Alkylthio, Aryloxy, Arylthio, SO₂H,

SO₂NR⁷R⁸, CO₂R¹², CONR⁷R⁸, NH-COR¹² oder einen Rest -(B)_m-D stehen,

- B ein Brückenglied aus der Gruppe direkte Bindung, CH₂, CO, CH(Alkyl), C(Alkyl)₂, NH, S, O oder -CH=CH- bedeutet, wobei (B)_m eine chemisch sinnvolle Reihenfolge von Brückengliedern B bedeutet mit m = 1 bis 10, vorzugsweise ist m = 1, 2, 3 oder 4,
 - D für den monovalenten Rest eines Redoxsystems der Formel

10

$$X^{1}$$
 (Red)

oder

$$\bigoplus_{X^2 \leftarrow CH - CH \xrightarrow{p} Y^2 } (Ox)$$

oder für einen Metallocenylrest oder Metallocenylcarbonylrest steht, wobei als Metallzentrum Titan, Mangan, Eisen, Ruthenium oder Osmium in Frage

X¹ und X² unabhängig voneinander für NR'R", OR" oder SR" stehen,

20

Y¹ für NR', O oder S steht, Y² für NR' steht,

n für 1 bis 10 steht und

kommt,

25 R' und R" unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Cycloalkyl, Aryl oder Hetaryl stehen, oder eine direkte Bindung oder eine Brücke zu einem der C-

Atome der
$$(CH = CH)_n$$
 bzw. $(CH = CH)_n$ Kette bilden,

w, x, y und z unabhängig voneinander für 0 bis 12 stehen und w+x+y+z \leq 12 sind,

R⁷ und R⁸ unabhängig voneinander für Alkylamino, Hydroxyalkylamino, Dialkylamino, Bishydroxyalkylamino, Arylamino oder R⁷ und R⁸ gemeinsam mit dem N-Atom, an das sie gebunden sind, einen heterocyclischen 5-, 6- oder 7-gliedrigen Ring bilden, gegebenenfalls unter Beteiligung weiterer Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe O, N und S, wobei NR⁷R⁸, insbesondere für Pyrrolidino, Piperidino oder Morpholino stehen,

R¹² für Alkyl, Aryl, Hetaryl oder Wasserstoff steht,

10

5

An für ein Anion steht, insbesondere für Halogenid, C₁- bis C₂₀-AlkylCOO, Formiat, Oxalat, Lactat, Glycolat, Citrat, CH₃OSO₃, NH₂SO₃, CH₃SO₃, ½ SO₄²- oder 1/3 PO₄³- steht.

Der Co-Phthalocyanin Komplex der Formel I kann auch in Form der Formel Ia vorliegen

$$R^{11}$$
|
Co Pc[R^3] w $[R^4]$ x $[R^5]$ y $[R^6]$ z (Ia)

worin

20

CoPc, L², die Reste R³-R⁶ sowie die Indices w, x, y und z die gleiche Bedeutung besitzen wie in Formel (I) und

25

R¹¹ ein kovalent gebundender Rest des Kobalt-Zentralatoms ist und sich von den primären oder sekundären Aminen oder vom Isonitril in der Bedeutung von L¹ ableitet, d.h. für -NR¹R², wobei R¹ und R² die oben angegebene Bedeutung besitzen oder für —C≡N—R An⊖ steht.

⊕

Die nachfolgenden Ausführungen beziehen sich jedoch der Einfachheit halber alle auf die Verbindungen der Formel (I). Sie gelten aber natürlich in gleicher Weise auch für die Formel (Ia).

Als heterocyclische Amin-Liganden in der Bedeutung von L¹ und L² sind bevorzugt Morpholin, Piperidin, Piperazin, Pyridin, 2,2-Bipyridin, 4,4-Bipyridin, Pyridazin, Pyrimidin, Pyrazin, Imidazol, Benzimidazol, Isoxazol, Benzisoxazol, Oxazol, Benzoxazol, Thiazol, Benzthiazol, Chinolin, Pyrrol, Indol, 3,3-Dimethylindol, die jeweils am Stickstoffatom mit dem Kobaltatom koordiniert sind.

10

Die Alkyl-, Alkoxy-, Aryl- und heterocyclischen Reste können gegebenenfalls weitere Reste wie Alkyl, Halogen, Hydroxy, Hydroxyalkyl, Amino, Alkylamino, Dialkylamino, Nitro, Cyano, CO-NH₂, Alkoxy, Alkoxycarbonyl, Morpholino, Piperidino, Pyrrolidino, Pyrrolidino, Trialkylsilyl, Trialkylsiloxy oder Phenyl tragen. Die Alkylund Alkoxyreste können gesättigt, ungesättigt, geradkettig oder verzweigt sein können, die Alkylreste können teil- oder perhalogeniert sein, die Alkyl- und Alkoxyreste können ethoxyliert oder propoxyliert oder silyliert sein. Benachbarte Alkyl und/oder Alkoxyreste an Aryl- oder heterocyclischen Resten können gemeinsam eine dreioder viergliedrige Brücke ausbilden.

20

30

15

Bevorzugt sind Verbindungen der Formel (I), worin für die Reste R^0 bis R^8 und R, R', R'' und R^{12} sowie für die Liganden L^1 und L^2 :

Substituenten mit der Bezeichnung "Alkyl" vorzugsweise C₁-C₁₆-Alkyl, insbesondere C₁-C₆-Alkyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom, Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C₁-C₆-Alkoxy substituiert sind;

Substituenten mit der Bezeichnung "Alkoxy" vorzugsweise C₁-C₁₆-Alkoxy, insbesondere C₁-C₆-Alkoxy bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom, Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C₁-C₆-Alkyl substituiert sind:

10

15

20

25

30

Substituenten mit der Bezeichnung "Cycloalkyl" vorzugsweise C₄-C₈-Cycloalkyl, insbesondere C₅ bis C₆-Cycloalkyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom oder Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C₁-C₆-Alkyl substituiert sind.

Substituenten mit der Bezeichnung "Alkenyl" vorzugsweise C₆-C₈-Alkenyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom oder Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C₁-C₆-Alkyl substituiert sind, insbesondere bedeutet Alkenyl Allyl,

Substituenten mit der Bedeutung "Hetaryl" vorzugsweise für heterocyclische Reste mit 5- bis 7-gliedrigen Ringen stehen, die vorzugsweise Heteroatome aus der Gruppe N, S und/oder O enthalten und gegebenenfalls mit aromatischen Ringen anelliert sind oder gegebenenfalls weitere Substituenten tragen beispielsweise Halogen, Hydroxy, Cyano und/oder Alkyl, wobei besonders bevorzugt sind: Pyridyl, Furyl, Thienyl, Oxazolyl, Thiazolyl, Imidazolyl, Chinolyl, Benzoxazolyl, Benzthiazolyl und Benzimidazolyl,

Die Substituenten mit der Bezeichnung "Aryl" vorzugsweise C₆-C₁₀-Aryl, insbesondere Phenyl oder Naphthyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie F, Cl, Hydroxy, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Alkoxy, NO₂ und/oder CN substituiert sind.

Bevorzugt werden Co-Phthalocyanin-Komplexe der Formel (I), worin

L¹ und L² unabhängig voneinander für Ammoniak, Methylamin, Ethylamin, Ethanolamin, Propylamin, Isopropylamin, Butylamin, Isobutylamin, tert. Butylamin, Pentylamin, tert. Amylamin, Benzylamin, Methylphenylhexylamin, Aminopropylamin, Aminopropylamin, 3-Dimethylaminopropylamin, 3-Diethylaminopropylamin, Diethylaminoethylamin, Dibutylaminpropylamin, Morpholinopropylamin, Piperidinopropylamin, Pyrrolidinopropylamin, Pyrrolidonopropylamin, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propylamin, Methoxyethylamin, Ethoxyethylamin, Methoxyethoxypropylamin, Isopropylamin, Methoxyethoxypropylamin, Isopropyloxyisopropylamin,

-7-

Dimethylamin, Diethylamin, Diethanolamin, Dipropylamin, Diisopropylamin, Dibutylamin, Diisobutylamin, Di-tert. butylamin, Dipentylamin, Ditert. amylamin, Bis(2-Ethylhexyl)amin, Bis(aminoethyl)amin, Bis(aminopropyl)amin, Bis(dimethylaminopropyl)amin, Bis(diethylaminopropyl)amin. Bis(diethylaminoethyl)amin, Bis(dibutylaminopropyl)amin, Di(morpholino-Di(piperidinopropyl)amin, Di(pyrrolidinopropyl)amin, Dipropyl)amin, (pyrrolidonopropyl)amin, Bis(3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propyl)amin, Dimethoxyethylamin, Diethoxyethylamin, Dimethoxypropylamin, Diethoxypropylamin, Di(methoxyethoxyethyl)amin, Di(methoxyethoxypropyl)amin, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amin, Di(isopropyloxyisopropyl)amin, Tripropylamin, Tri(methoxyethoxyethyl)amin, Tri(methoxyethoxypropyl)amin, Diethylaminoethylpiperazin, Dipropylaminoethylpiperazin, Morpholin, Piperidin, Piperazin, Pyridylamin, 2-Thiazolylamin, 2-Benzthiazolylamin, 2-Benzoxazolylamin, 3-Iminoisoindoleninylamin, Pyridin, Propylpyridin, Butylpyridin, 2,2-Bipyridin, 4,4-Bipyridin, Pyridazin, Pyrimidin, Pyrazin, Imidazol, Benzimidazol, Isoxazol, Benzisoxazol, Oxazol, Benzoxazol, Benzthiazol, Chinolin, Pyrrol, Indol, 3,3-Dimethylindol, Aminopyridin, Anilin, p-Toluidin, p-tert. Butylanilin, p-Anisidin, Isopropylanilin, Butoxyanilin oder Naphtylamin stehen,

20

25

30

5

10

15

oder

L¹ und L² unabhängig voneinander für Methylisonitril, Ethylisonitril, Ethanolisonitril, Propylisonitril, Isopropylisonitril, Butylisonitril, Isobutylisonitril, tert. Butylisonitril, Pentylisonitril, tert-Amylisonitril, Benzylisonitril, Methylphenylhexylisonitril, Aminopropylisonitril, Aminoethylisonitril, 3-Dimethylaminopropylisonitril, 3-Diethylaminopropylisonitril, Diethylaminoethylisonitril, Dibutylaminpropylisonitril, Morpholinopropylisonitril, Piperidinopropylisonitril, Pyrrolidinopropylisonitril, Pyrrolidonopropylisonitril, 3-(Methylhydroxyethylamino)propylisonitril, Methoxyethylisonitril, Ethoxyethylisonitril, Methoxypropylisonitril, Me

WO 02/25205

5

10

15

-8-

PCT/EP01/10427

isonitril, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylisonitril, Isopropyloxyisopropylisonitril, Dimethylisonitril, Diethylisonitril, Diethanolisonitril, Dipropylisonitril, Diisopropylisonitril, Dibutylisonitril, Diisobutylisonitril, Di-tert.-butylisonitril, Dipentylisonitril, Di-tert.-amylisonitril, Bis(2-Ethylhexyl)isonitril, Bis(aminoethyl)isonitril, Bis(aminopropyl)isonitril, Bis(dimethylamino-Bis(diethylaminopropyl)isonitril, propyl)isonitril. Bis(diethylaminoethyl)isonitril, Bis(dibutylaminpropyl)isonitril, Di(morpholinopropyl)isonitril, Di(piperidinopropyl) isonitril, Di(pyrrolidinopropyl)isonitril, Di(pyrrolidonopropyl)isonitril, Bis(3-(Methyl-hydroxyethylamino)propyl)isonitril, Dimethoxyethylisonitril, Diethoxyethylisonitril, Dimethoxypropylisonitril, Diethoxypropylisonitril, Di(methoxyethoxyethyl)isonitril, Di(methoxyethoxypropyl)isonitril, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)isonitril, Di(isopropyloxyisopropyl)isonitril, Tripropylisonitril, Tri(methoxyethoxyethyl)isonitril, Tri(methoxyethoxypropyl) isonitril, Pyridylisonitril, 2-Thiazolylisonitril, 2-2-Benzoxazolylisonitril, Benzthiazolylisonitril, 3-Iminoisoindoleninylisonitril, Phenylisonitril, p-tert.-Butylphenylisonitril, p-Methoxyphenylisonitril, Isopropylphenylisonitril, Butoxyphenylisonitril oder Naphtylisonitril stehen,

R³, R⁴, R⁵ und R⁶ unabhängig voneinander für Chlor, Fluor, Brom, Iod, Cyano, 20 Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, tert. Butyl, Pentyl, tert. Hydroxyethyl, 3-Dimethylaminopropyl, 3-Diethylaminopropyl, Amyl, Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopropylphenyl, Trifluormethylphenyl, Naphthyl, Methylamino, Ethylamino, Propylamino, Isopropylamino, Butylamino, Isobutylamino, tert. Butylamino, Pentylamino, 25 Amvlamino. Benzylamino, Methylphenylhexylamino, Hvdroxyethylamino, Aminopropylamino, Aminoethylamino, 3-Dimethylaminopropylamino, 3-Diethylaminopropylamino, Diethylaminoethylamino, Dibutylaminpropylamino, Morpholinopropylamino, Piperidinopropylamino, Pyrrolidinopropylamino, Pyrrolidonopropylamino, 3-(Methyl-Hydroxyethyl-30 amino)propylamino, Methoxyethylamino, Ethoxyethylamino, propylamino, Ethoxypropylamino, Methoxyethoxypropylamino, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylamino, Isopropyloxypropylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Diethanolamino, Dipropylamino, Diisopropylamino, Dibutylamino, Diisobutylamino, Di-tert. butylamino, Dipentylamino, Di-tert. amylamino, Bis(2-Ethylhexyl)amino, Bis(aminopropyl)amino, Bis(aminoethyl)amino, Bis(3-Dimethylaminopropyl)amino, Bis(3-Diethylaminopropyl)amino, Bis-(Diethylaminoethyl)amino, Bis(dibutylaminpropyl)amino, Di(morpholinopropyl)amino, Di(piperidinopropyl)amino, Di(pyrrolidinopropyl)amino, Di-(pyrrolidonopropyl)amino, Bis(3-(Methyl-hydroxyethylamino)propyl)amino, Dimethoxyethylamino, Diethoxyethylamino, Dimethoxypropylamino, Diethoxypropylamino, Di(methoxyethoxyethyl)amino, Di(methoxyethoxypropyl)amino, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Di(isopropyloxyisopropyl)amino, Methoxy, Ethoxy, Propyloxy, Isopropyloxy, Butyloxy, Isobutyloxy, tert. Butyloxy, Pentyloxy, tert. Amyloxy, Methoxyethoxy, Ethoxyethoxy, Methoxypropyloxy, Ethoxypropyloxy, Methoxyethoxypropyloxy, 3-(2-Ethylhexyloxy) propyloxy, Methylthio, Ethylthio, Propylthio, Isopropylthio, Butylthio, Isobutylthio, tert.-Butylthio, Pentylthio, tert.-Amylthio, Phenyl, Methoxyphenyl, Trifluormethylphenyl, CO₂R¹², CONR⁷R⁸, NH-COR¹², SO₃H, SO₂NR⁷R⁸, oder für einen Rest der **Formel**

20

5

10

15

worin

wobei der Stern (*) die Anknüpfung mit dem 5-Ring anzeigt,

M für ein Mn oder Fe-Kation steht,

5 w, x, y und z unabhängig voneinander für 0 bis 8 stehen und w+x+y+z \leq 12 sind,

An für Chlorid, Bromid, Fluorid, C₁- bis C₂₀-AlkylCOO , Formiat, Oxalat, Lactat, Glycolat, Citrat, CH₃OSO₃ , NH₂SO₃ , CH₃SO₃ , ½ SO₄ oder 1/3 PO₄ steht,

10

15

20

25

30

NR⁷R⁸ für Amino. Methylamino, Ethylamino, Propylamino, Isopropylamino, Butylamino, Isobutylamino, tert. Butylamino, Pentylamino, tert. Amylamino, Benzylamino, Methylphenylhexylamino, 2-Ethyl-1-hexylamino, Hydroxyethyl-Aminopropylamino, Aminoethylamino, 3-Dimethylaminopropylamino, 3-Diethylaminopropylamino, Morpholinopropylamino, Piperidinopropylamino, Pyrrolidinopropylamino, Pyrrolidonopropylamino, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino) propylamino, Methoxyethylamino, Ethoxyethylamino, Methoxypropylamino, Ethoxypropylamino, Methoxyethoxypropylamino, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylamino, Isopropyloxyisopropylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Dipropylamino, Diisopropylamino, Dibutylamino, Diisobutylamino, Di-tert. butylamino, Dipentylamino, Di-tert. Amylamino, Bis(2-Ethylhexyl)amino, Dihydroxyethylamino, Bis(aminopropyl)amino, Bis(aminoethyl)amino, Bis(3-Dimethylaminopropyl)amino, Bis(3-Diethylaminopropyl)amino, Di(morpholinopropyl)amino, Di(piperidinopropyl)amino, Di(pyrrolidinopropyl)amino, Di(pyrrolidonopropyl)amino, Bis(3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propyl)amino, Dimethoxyethylamino, Diethoxyethylamino, Dimethoxypropylamino, Diethoxypropylamino, Di(methoxyethoxypropyl)amino, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Di(isopropyloxyisopropyl)amino, Anilino, p-Toluidino, p-tert. Butylanilino, p-Anisidino, Isopropylanilino oder Naphtylamino stehen oder NR⁷R⁸ für Pyrrolidino, Piperidino, Piperazino oder Morpholino stehen,

R¹² für Wasserstoff, Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, ter.-Butyl, Pentyl, tert.-Amyl, Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopropylphenyl, p-Trifluormethylphenyl, Cyanophenyl, Naphthyl, 4-Pyridinyl, 2-Pyridinyl, 2-Pyrrolyl oder 2-Indolyl steht,

wobei

5

10

15

20

die Alkyl-, Alkoxy-, Aryl- und heterocyclischen Reste gegebenenfalls weitere Reste wie Alkyl, Halogen, Hydroxy, Hydroxyalkyl, Amino, Alkylamino, Dialkylamino, Nitro, Cyano, CO-NH₂, Alkoxy, Alkoxycarbonyl, Morpholino, Piperidino, Pyrrolidino, Pyrrolidino, Pyrrolidono, Trialkylsilyl, Trialkylsiloxy oder Phenyl tragen können, die Alkylund/oder Alkoxyreste gesättigt, ungesättigt, geradkettig oder verzweigt sein können, die Alkylreste teil- oder perhalogeniert sein können, die Alkyl- und/oder Alkoxyreste ethoxyliert oder propoxyliert oder silyliert sein können, benachbarte Alkyl und/oder Alkoxyreste an Aryl- oder heterocyclischen Resten gemeinsam eine drei- oder viergliedrige Brücke ausbilden können.

Unter Redoxsystemen im Rahmen dieser Anmeldung werden insbesondere die in der Angew. Chem. 1978, S. 927 und in Topics of Current Chemistry, Vol. 92, S. 1 (1980), beschriebenen Redoxsystemen verstanden.

Bevorzugt sind p-Phenylendiamine, Phenothiazine, Dihydrophenazine, Bipyridiniumsalze (Viologene), Chinodimethane.

25

Besonders bevorzugt sind solche Co-Komplexe der Formel I, die der Formel (Ib) entsprechen

$$H_2NR^2$$
 $Co^{\oplus}Pc (SO_2NR^7R^8)_{0-4}$ (Halogen)₀₋₁₀ (Alkoxy)₀₋₄ An Co
 H_2NR^2

WO 02/25205

- 12 -

worin

Halogen für Chlor, Brom oder Fluor steht,

5 Alkoxy für C_1 - C_6 -Alkoxy steht,

R⁷ und R⁸ unabhängig voneinander die oben angegebenen Bedeutungen haben,

PCT/EP01/10427

An[⊖], CoPc und R² ebenfalls die oben angegebene Bedeutung haben.

Die Erfindung betrifft im übrigen auch die Verbindung der Formel Ic

$$H_2NR^2$$
 $Co^{\bigoplus}Pc(SO_2NR^7R^8)$
 I_{-4}
 H_2NR^2
(Halogen)₀₋₁₀
(Alkoxy)₀₋₄
An \bigcirc
(Ic)

worin

Halogen

10

15

für Chlor, Brom oder Fluor steht,

Alkoxy für C₁-C₆-Alkoxy steht, das gegebenenfalls substituiert ist,

20 R⁷ und R⁸ unabhängig voneinander die obige Bedeutung besitzen,

und die übrigen Substituenten die oben angegebene Bedeutung besitzen.

Die Erfindung betrifft auch ein Verfahren zur Herstellung von Verbindungen der Formel (Ic), das dadurch gekennzeichnet ist, dass man ein mit Sulfonamidgruppen der Formel SO₂NR⁷R⁸, wobei R⁷ und R⁸ die oben genannte Bedeutung haben, und gegebenenfalls Halogen- und/oder Alkoxy-substituentes Co-Phthalocyanin oxidiert und mit Aminen L¹ und L² umsetzt.

5

20

Bevorzugt erfolgt die Herstellung ausgehend von einem gegebenenfalls mit Halogen und/oder Alkoxy substituierten Co-Phthalocyanin durch Sulfochlorierung mit Chlorsulfonsäure und Thionylchlorid bei 50-130°C und Umsetzung mit dem entsprechenden Amin zum Amid in Waser bei pH 8-12 bei Raumtemperatur bis 100°C. Die anschließende Einführung der axialen Amin-Substituenten erfolgt vorzugsweise in bekannter Weise unter oxidativen Bedingungen, z.B.Chlor oder Luft, vorzugsweise Luft, im Falle von Luft in Gegenwart von überschüssigem Amin (s. Beispiel 13). Im Falle von Chlor erfolgt erst die Oxidation, dann wird das Amin zugesetzt.

- Besonders bevorzugt enthält die mit Licht beschreibbare Informationsschicht als lichtabsorbiende Verbindungen neben einer Verbindung der Formel I zusätzlich noch wenigstens ein anderes gegebenenfalls substituiertes Phthalocyanin mit oder ohne Zentralatom.
- Als Zentralatom kommt beispielsweise eines aus der Gruppe Si, Zn, Al, Cu, Pd, Pt, Au und Ag, insbesondere Cu und Pd in Frage.

Besonders bevorzugt sind beispielsweise die aus DE-A 19 925 712 bekannten sulfonamidsubstituierten Cu-Phthalocyanine. Besonders bevorzugt sind solche der Formel II

$$\text{CuPc} \underbrace{\left(\text{SO}_{2}\text{-NH-A-NR}^{9}\text{R}^{10}\right)_{x}}_{\left(\text{SO}_{3}\text{H}\right)_{y}} \tag{II),}$$

worin

- 25 CuPc für einen Kupferphthalocyanin-Rest steht,
 - A für ein gegebenenfalls substituiertes geradkettiges oder verzweigtes C₂-C₆-Alkylen wie z.B. Ethylen, Propylen, Butylen, Pentylen, Hexylen steht,

WO 02/25205

PCT/EP01/10427

- 14 -

R⁹ und R¹⁰ unabhängig voneinander für Wasserstoff oder jeweils gegebenenfalls substituiertes geradkettiges oder verzweigtes C₁-C₆-Alkyl wie z.B. Methyl, Ethyl, Propyl, Butyl, Pentyl, Hexyl, insbesondere für substituiertes C₁-C₆-Hydroxyalkyl sowie für unsubstituiertes C₁-C₆-Alkyl

stehen,

oder R¹ und R² zusammen mit dem N-Atom, an das sie gebunden sind, einen heterocyclischen 5- oder 6-Ring bilden, der gegebenenfalls ein weiteres Heteroatom, z.B. S, N oder O enthält,

x für 2,0 bis 4,0 steht,

y für 0 bis 1,5 steht und

15

10

5

die Summe von x und y 2,0 bis 4,0, bevorzugt 2,5 bis 4,0 beträgt.

Besonders bevorzugt eignen sich als Mischungskomponente solche der Formel (II), die der Formel (IIa) entsprechen

20

$$CuPc - [SO2NH-CH2CH2CH2N(CH2)3]$$
 (IIa),

worin

CuPc Kupfer-Phthalocyanin bedeutet.

25

Als weitere bevorzugte zusätzliche lichtabsorbierende Verbindungen eignen sich die Sulfonamid- bzw. Amido-substituierten Phthalocyanine wie sie beispielsweise aus EP-A-519 395 bekannt sind.

Bevorzugt beträgt im Falle von Mischungen verschiedener lichtabsorbierender Verbindungen der Anteil der Verbindungen der Formel (I) davon 10 bis 90 Gew.-%.

Besonders beyorzugt ist eine Mischung der Formeln (I) und (II) in einem Gewichtsverhältnis von 10:90 bis 90:10, bevorzugt 20:80 bis 80:20, besonders bevorzugt von 40:60 bis 60:40.

5

Die Informationsschicht kann neben der lichtabsorbierenden Verbindung noch Binder, Netzmittel, Stabilisatoren, Verdünner und Sensibilisatoren sowie weitere Bestandteile enthalten.

10

Die Substrate können aus optisch transparenten Kunststoffen hergestellt sein, die, wenn notwendig, eine Oberflächenbehandlung erfahren haben. Bevorzugte Kunststoffe sind Polycarbonate und Polyacrylate, sowie Polycycloolefine oder Polyolefine.

15

Die Reflektionsschicht kann aus jedem Metall bzw. Metallegierung, die üblicherweise für beschreibbare optische Datenträger benutzt werden, hergestellt sein. Geeignete Metalle bzw. Metallegierungen können aufgedampft und gesputtert werden und enthalten z.B. Gold, Silber, Kupfer, Aluminium und deren Legierungen untereinander oder mit anderen Metallen.

20

Die mögliche Schutzschicht über der Reflektionsschicht kann aus UV-härtendenen Acrylaten bestehen.

Eine mögliche Zwischenschicht, die die Reflektionsschicht beispielsweise vor Oxidation schützt, kann ebenfalls vorhanden sein.

25

30

Die Erfindung betrifft weiterhin ein Verfahren zur Herstellung der erfindungsgemäßen optischen Datenträger, das dadurch gekennzeichnet ist, dass man auf ein transparentes Substrat, die mit Licht beschreibbare Informationsschicht durch Beschichten mit wenigstens einem Co-Phthalocyaninkomplex der Formel I, gegebenenfalls in Kombination mit geeigneten Bindern, Additiven und Lösungsmitteln auf-

5

10

15

20

25

30

- 16 -

bringt und weiter gegebenenfalls mit einer Reflexionsschicht, gegebenenfalls weiteren Zwischenschichten und gegebenenfalls einer Schutzschicht versieht.

Die Beschichtung des Substrates mit der lichtabsorbierenden Verbindung der Formel I gegebenenfalls in Kombination mit weiteren Farbstoffen, Bindern und/oder Lösungsmitteln erfolgt vorzugsweise durch Spin Coating.

Für das Coating wird die lichtabsorbierende Verbindung der Formel I vorzugsweise mit oder ohne Additive in einem geeigneten Lösungsmittel oder Lösungsmittelgemisch gelöst, so dass die Verbindung der Formel I 100 oder weniger, beispielsweise 10 bis 20 Gewichtsanteile auf 100 Gewichtsanteile Lösungsmittel ausmacht. Die beschreibbare Informationsschicht wird danach vorzugsweise bei reduziertem Druck durch Sputtern oder Aufdampfen metallisiert (Reflexionsschicht) und eventuell anschließend mit einem Schutzlack (Schutzschicht) oder einem weiteren Substrat oder einer Abdeckschicht versehen. Mehrschichtige Anordnungen mit teiltransparenter Reflektionsschicht sind auch möglich.

Lösungsmittel bzw. Lösungsmittelgemische für das Beschichten der lichtabsorbierenden Verbindungen der Formel I oder ihrer Mischungen mit Additiven und/oder Bindemitteln sowie anderen lichtabsorbierenden Verbindungen werden einerseits nach ihrem Lösungsvermögen für die lichtabsorbierende Verbindung der Formel I und die anderen Zusätze und andererseits nach einem minimalen Einfluss auf das Substrat ausgewählt. Geeignete Lösungsmittel, die einen geringen Einfluss auf das Substrat haben, sind beispielsweise Alkohole, Ether, Kohlenwasserstoffe, halogenierte Kohlenwasserstoffe, Alkoxyalkohole, Ketone. Beispiele solcher Lösungsmittel sind Methanol, Ethanol, Propanol, 2,2,3,3-Tetrafluorpropanol, Butanol, Diacetonalkohol, Benzylalkohol, Tetrachloroethan, Dichlormethan, Diethylether, Dipropylether, Dibutylether, Methyl-tert.-butylether, Methoxyethanol, Ethoxyethanol, 1-Methyl-2-propanol, Methylethylketon, 4-Hydroxy-4-methyl-2-pentanon, Hexan, Cyclohexan, Ethylcyclohexan, Octan, Benzol, Toluol, Xylol. Bevorzugte Lösungs-

WO 02/25205

PCT/EP01/10427

mittel sind Kohlenwasserstoffe und Alkohole, da sie den geringsten Einfluß auf das Substrat ausüben.

- 17 -

Geeignete Additive für die beschreibbare Informationsschicht sind Stabilisatoren,

Netzmittel, Binder, Verdünner und Sensibilisatoren.

WO 02/25205

- 18 -

PCT/EP01/10427

Beispiele:

Die folgenden präparativen Beispiele zeigen die Herstellung der erfindungsgemäß zu verwendenden Farbstoffe.

5

10

Beispiel 1

115 g Co-Phthalocyanin wurden bei Raumtemperatur in 1 1 trockenem Chlorbenzol eingetragen. Es wurden 16 g Chlor eingeleitet und 30 min nachgerührt. Nach dem Entfernen des überschüssigen Chlors durch Ausblasen mit Stickstoff wurden 90 g 3-(Methyl-hydroxyethyl)propylamin zugetropft. Es wurde 30 min bei 90°C nachgerührt und nach dem Abkühlen auf Raumtemperatur abgenutscht. Es wurde mit 1 l Chlorbenzol und 1 l Wasser nachgewaschen und der erhaltene Farbstoff im Vakuum getrocknet.

15

Man erhielt 156 g Farbstoff der Formel

$$\begin{array}{c} \mathrm{NH_2(CH_2)_3N(CH_3)CH_2CH_2OH} \\ \stackrel{\longleftarrow}{\mathrm{Co}} \oplus_{\mathrm{Pc}} \mathrm{Cl} \\ \stackrel{\frown}{\mathrm{NH_2(CH_2)_3N(CH_3)CH_2CH_2OH}} \end{array}$$

 λ_{max} 670nm(NMP).

20

Analog wurden folgende Verbindungen hergestellt, in dem man das 3-(Methylhydroxyethyl)propylamin durch ein anderes Amin oder Isonitril in gleicher molarer Menge ersetzte.

Bei- spiel	L^1 und L^2	R^3 - R^6	λ _{max} nm (NMP)	
2	H ₂ N-(CH ₂) ₁₇ CH ₃	H	664	
3	H ₂ N(CH ₂) ₃ —N	H	669	
4	H ₂ N(CH ₂) ₃ N(CH ₃) ₂	Н	668	
5	H ₂ N(CH ₂) ₃ OCH ₂ CH ₃	Н	665	
6	H_2N — CH — CH_2 — $(OCH_2\ CH)_3$ - NH_2 CH_3 CH_3	Н	666	
7	H ₂ N—CH-CH ₂ O(CH-CH ₂ -O-)—H CH ₃ CH ₃	Н	666	
8	CH ₂ CH ₃	Н	667	
	H ₂ N(CH ₂) ₃ O-CH ₂ CH-(CH ₂) ₃ CH ₃		,	
9	T N	Н	664	
10	C≣N—C(CH ₃) ₃	Н	665	

Beispiel 11

5 80 g Nonabrom-Chlor-Co-Phthalocyanin wurden bei Raumtemperatur in 11 trockenem Chlorbenzol eingetragen. Es wurden 5 g Chlor eingeleitet und 30 min nachgerührt. Nach dem Entfernen des überschüssigen Chlor durch Ausblasen mit Stickstoff wurden 28 g 3-(Methyl-hydroxyethyl)propylamin zugetropft. Es wurde 30 min bei 90°C nachgerührt und nach dem Abkühlen auf Raumtemperatur abgesaugt. Es wurde mit 11 Chlorbenzol und 11 Wasser nachgewaschen und der Farbstoff im Vakuum getrocknet.

Man erhielt 88 g Farbstoff der Formel

$$\begin{array}{c} \text{H}_{2}\text{N}(\text{CH}_{2})_{3}\text{N}(\text{CH}_{3})\text{CH}_{2}\text{CH}_{2}\text{OH} \\ \stackrel{!}{\downarrow} \\ \stackrel{!}{\downarrow} \\ \stackrel{!}{\downarrow} \\ \text{H}_{2}\text{N}(\text{CH}_{2})_{3}\text{N}(\text{CH}_{3})\text{CH}_{2}\text{CH}_{2}\text{OH} \end{array}$$

 λ_{max} 684nm(NMP).

5

Analog wurden folgende Verbindungen hergestellt, in dem man entsprechend die molare Menge eines anderen Amins einsetzte.

Bei- spiele	L ¹ und L ²	R ³	R ⁴	R ⁵ -R ⁸	λ _{max} nm (NMP)
12	Methoxy-ethoxy- propylamin	Br ₉	C1	Н	685
13	3-Dimethyl- aminopropyl-amin	Br ₉	CI	H	684

10 Beispiel 14

Sulfochlorierung:

Cobalt-Phthalocyanin 98,8 % wird innerhalb von 30 min in

Chlorsulfonsäure 98 % eingetragen. Der Ansatz wird innerhalb von

25 min auf 119°C aufgeheizt, 4h bei 119°C gerührt, auf 85°C aufgekühlt und bei 85-88°C innerhalb von 2 h

Thionylchlorid (mind 98 %) zugetropft; danach wird innerhalb von 20 min auf 90-92°C aufgeheizt, 4h bei 90-92°C gerührt, anschließend auf RT gerührt.

Ausbeute: 802 g Schmelze

- 21 -

Amidbildung:

381 g Schmelze wurden auf

1700 g Eis ausgetragen. Temperatur = -5°C. Das ausgefallene Sulfochlorid

wurde sofort abgesaugt, mit

1000 ml Eiswasser neutralgewaschen und gut trockengesaugt. Das feuchte

Sulfochlorid wurde sofort weiterverarbeitet.

750 g Eis und

750 ml Eiswasser wurden vorgelegt. In diese Mischung wurde unter Rühren

das Sulfochlorid schnell eingetragen. Danach wurde

39 g 3-Dimethylaminopropylamin zugegeben. Das Gemisch wurde an-

schließend innerhalb von 60 min auf 80°C aufgeheizt. Den pH-Wert

dabei mittels 10 %iger NaOH-Lösung bei pH 10.00 gehalten und den

Versuch 45 Minuten bei 80°C und pH 10,0 nachgerührt.

Nach dem Abkühlen auf Raumtemperatur wurde abgesaugt, mit

1000 ml Wasser portionsweise gewaschen.

Das Produkt wurde im Vakuumtrockenschrank getrocknet.

Ausbeute: 126,00 g

Einführung der axialen Liganden

5 354 g 3-Dimethylaminopropylamin und 14 g NH₄Cl wurden 90°C 1 Stunde erwärmt. Nach Abkühlen auf Raumtemperatur wurden 247 g Co-Phthalocyanin-tetrasulfo-3-dimethylaminopropylamid und 1 g CoCl₂ zugegeben. Es wurde dann 10 Stunden Luft eingeleitet. Die Mischung wurde auf 5 l Wasser gegeben und abfiltriert. Der Farbstoff wurde im Vakuum getrocknet.

Man erhielt 275 g Farbstoff der Formel

$$\begin{array}{c} {\rm NH_2(CH_2)_3N(CH_3)_2} \\ \vdots \\ {\rm Co}^{\bigoplus} {\rm Pc} \ ({\rm SO_2NH(CH_2)_3N(CH_3)_2})_4 \quad {\rm Cl}^{\bigoplus} \\ \vdots \\ {\rm NH_2(CH_2)_3N(CH_3)_2} \end{array}$$

5 Beispiel 15

Sulfochlorierung:

131 g Cobalt-Phthalocyanin 98,8 % wird innerhalb von 30 min in

394 ml Chlorsulfonsäure 98 % eingetragen. Der Ansatz wird innerhalb von

25 min auf 119°C aufgeheizt, 4h bei 119°C gerührt, auf 85°C aufge-

kühlt und bei 85-88°C innerhalb von 2 h

120 ml Thionylchlorid (mind 98 %) zugetropft; danach wird innerhalb von

20 min auf 90-92°C aufgeheizt und 4h bei 90-92°C gerührt, an-

schließend auf RT gerührt.

Ausbeute: 802 g Schmelze

- 23 -

Amidbildung:

381 g Schmelze wurden auf

1700 g Eis ausgetragen. Temperatur = -5°C. Das ausgefallene Sulfochlorid

wurde sofort abgesaugt, mit

1000 ml Eiswasser neutralgewaschen und gut trockengesaugt. Das feuchte

Sulfochlorid wurde sofort weiterverarbeitet.

750 g Eis und

750 ml Eiswasser werden vorgelegt. In diese Mischung wird unter Rühren

das Sulfochlorid schnell eingetragen. Danach wird

Methoxyethoxypropylamin zugegeben. Das Gemisch wird anschlie-

ßend innerhalb von 60 min auf 80°C aufgeheizt. Der pH-Wert wurde

dabei mittels 10 %iger NaOH-Lösung bei pH 10.00 gehalten und

45 Minuten bei 80°C und pH 10,0 nachgerührt.

Nach dem Abkühlen auf Raumtemperatur wird abgesaugt, mit

1000 ml Wasser portionsweise gewaschen.

Das Produkt wurde im Vakuum getrocknet.

Ausbeute: 112 g

Einführung axialer Liganden

Eine Mischung von

199 g Co-Phthalocyanin-tetrasulfo-methoxyethoxypropylamid

280 g Imidadzol wurde mit DMF

ca. 1000 ml aufgefüllt und 24 h im offenen Becherglas gerührt.

Zu dieser Mischung wurde

1500 ml Wasser zugetropft. Das Produkt wurde abfiltriert und anschließend

mit

1000 ml Wasser gewaschen. Der Farbstoff wurde im Vakuum getrocknet.

Man erhielt 197 g Farbstoff der Formel

 λ_{max} 670 nm (NMP)

Beispiel 16

5

Sulfochlorierung:

Cobalt-Phthalocyanin 98,8 % wurde innerhalb von 30 min in

288 ml Chlorsulfonsäure 98 % eingetragen. Das Gemisch wurde auf 75°C

augeheizt und 4 h bei 75°C gerührt. Nach dem Aufheizen auf 80°C

wurde innerhalb von 2 h

120 ml Thionylchlorid (mind 98 %) zugetropft. Das Gemisch wurde nach 4h

bei 80°C gerührt und anschließend auf RT gerührt.

Ausbeute: 712 g Schmelze

- 25 -

Amidbildung:

402 g Schmelze wurden auf

1700 g Eis ausgetragen. Das ausgefallene Sulfochlorid wurde sofort abge-

saugt, mit

1000 ml Eiswasser neutralgewaschen und gut trockengesaugt. Das feuchte

Sulfochlorid wurde sofort weiterverarbeitet.

750 g Eis und

750 ml Eiswasser wurden vorgelegt. In diese Mischung wurde unter Rühren

das Sulfochlorid schnell eingetragen. Danach wurde

20 g Diisobutylamin zugegeben. Das Gemisch wurde anschließend inner-

halb von 60 min auf 80°C aufgeheizt. Der pH-Wert wurde dabei mittels 10 %iger NaOH-Lösung bei pH 10.00 gehalten und dann

45 Minuten bei 80°C und pH 10,0 nachgerührt.

Nach dem Abkühlen auf Raumtemperatur wurde abgesaugt und mit

1000 ml VE-Wasser portionsweise gewaschen.

Das Produkt wurde im Vakuum getrocknet.

Ausbeute: 95 g

Einführung axialer Liganden

5 354 g 3-Dimethylaminopropylamin und 14 g NH₄Cl wurden 90°C 1 Stunde erwärmt. Nach Abkühlen auf Raumtemperatur wurden 219 g Co-Phthalocyanin-trisulfodiisobutylamid und 1 g CoCl₂ zugegeben. Es wurde dann 10 Stunden Luft eingeleitet. Die Mischung wurde auf 5 l Wasser gegeben und abfiltriert. Der Farbstoff wurde im Vakuum getrocknet.

- 26 -

Man erhielt 240 g Farbstoff der Formel

$$\begin{array}{c} \mathrm{NH_2(CH_2)_3N(CH_3)_2} \\ \vdots \\ \mathrm{Co}^{\bigoplus} \mathrm{Pc} \left(\mathrm{SO_2N(CH_2)_3CH(CH_3)_2} \right)_2 \quad \mathrm{Cl}^{\bigodot} \\ \vdots \\ \mathrm{NH_2(CH_2)_3N(CH_3)_2} \end{array}$$

5 λ_{max} 670 nm (NMP)

Analog wurden folgende Verbindungen hergestellt, in dem man die entsprechende molare Menge eines anderen Amins L¹ bzw. L² einsetzte:

Bei- spiele	L ¹ und L ²	R³	R ⁴	R ⁵	R ⁶	R ⁷	R ⁸	λ _{max} nm (NMP)
17	3-Dimethyl- aminopropyl- amin	SO ₃ H	(SO ₂ N H-R ⁷) ₃	Н	H	3-Dimethyl- aminopropyl	Н	671
18	Methoxy- ethoxy- propylamin	Br ₂	Cl ₄	SO ₃ H	(SO ₂ N- R ⁸ R ⁷) ₃	Isobutyl	Isobutyl	679
19	3-Dimethyl- aminopropyl- amin	(SO ₂ NH- R ⁷) ₃	Н	Н	Н	3-Dimethyl- aminopropyl	Н	672

10

15

Beispiel 20

32 g 3-(Methoxyethoxy)phthalonitril und 385 ml 1-Butanol werden zum Sieden erhitzt und mit 21 g Lithium versetzt. Diese Mischung wird 1 h bei 120°C erhitzt. Nach dem Abkühlen wird 500 ml Wasser zugegeben und abgesaugt. Ausbeute 15 g Farbstoff.

Einführung des Metalls:

15 g des grünen Farbstoffs werden in 200 ml DMF gegeben und mit 2 g CoCl₂ versetzt. Die Mischung wird 2 h auf Rückfluss erhitzt. Nach dem Abkühlen wird mit 200 ml Wasser versetzt und abgesaugt. Ausbeute 12 g Farbstoff.

Einführung axialer Liganden:

Eine Mischung von 12 g Farbstoff und 24 g Imidazol wird mit 200 ml DMF in einem offenen Becherglas 24 h gerührt. Es wird 250 ml Wasser zugegeben und abgesaugt. Der Farbstoff wurde im Vakuum getrocknet. Man erhielt 11 g Farbstoff der Formel

 λ_{max} 715 nm (NMP)

15

5

10

Analog wurde folgende Verbindung hergestellt:

Beispiel 21

 λ_{max} 718 nm (NMP)

Beispiel 22

5

10

15

Es wurde bei Raumtemperatur eine 2 %ige Lösung einer Farbstoffmischung aus gleichen Gewichtsteilen des CoPc-Komplexes aus Beispiel 5 und der Verbindung der Formel IIa in 2,2,3,3-Tetrafluorpropanol hergestellt. Diese Lösung wurde mittels Spin Coating auf ein pregrooved Polycarbonat Substrat appliziert. Das pregrooved Polycarbonat wurde mittels Spritzguß als Disk hergestellt. Die Dimensionen der Disk und der Groovestruktur entsprachen denen, die üblicherweise für CD-R verwendet werden. Die Disk mit der Farbstoffschicht als Informationsträger wurde mit 100 nm Ag bedampft. Anschließend wurde ein UV-härtbarer Acryllack durch Spin Coating appliziert und mittels einer UV-Lampe ausgehärtet. Mit einem kommerziellen Testschreiber für CD-R (Pulstec[®] OMT 2000 x 4) wurde z.B. bei 12 mW Schreibleistung

und einfacher Schreibgeschwindigkeit (1,4 m/s) beim Auslesen der Information eine Modulationshöhe von 38 % (30 % bis 70 % ist CD-R Spezifikation) für das 3T Signal und 62% (> 60 % ist CD-R Spezifikation) für das 11T Signal erhalten.

- 29 -

5 Beispiel 23

Es wurde bei Raumtemperatur eine 2 % Lösung einer Farbstoffmischung aus gleichen Gewichtsteilen des CoPc-Komplexes aus Beispiel 4 und der Verbindung der Formel IIa in 2,2,3,3-Tetrafluorpropanol hergestellt. Diese Lösung wurde mittels Spin Coating appliziert. Mit einem kommerziellen Testschreiber für CD-R (Pulstec[®] OMT 2000 x 4) wurde z.B. bei 14 mW Schreibleistung und zweifacher Schreibgeschwindigkeit (2,8 m/s) beim Auslesen der Information eine Modulationshöhe von 32 % (30 % bis 70 % ist CD-R Spezifikation) für das 3T Signal und 68 % (> 60 % ist CD-R Spezifikation) für das 11T Signal erhalten.

15

20

10

Beispiel 24

Es wurde bei Raumtemperatur eine 32 % Lösung einer Farbstoffmischung aus gleichen Gewichtsteilen Phthalogenblau des Co-Pc-Komplexes aus Beispiel 4 und der Verbindung der Formel IIa in 10 %iger Essigsäure hergestellt. Diese Stammlösung wurde mit Diacetonalkohol auf 8 % Farbstoffanteil verdünnt. Diese Lösung wurde mittels Spin Coating analog Beispiel 22 auf das Substrat aufgetragen und das Substrat analog Bsp. 20 mit einer Reflexions- und Schutzschicht versehen. In Abänderung zu Beispiel 20 wurden jedoch lediglich 50 nm Ag als Reflexionsschicht aufgetragen. Mit einem kommerziellen Testschreiber für CD-R (Pulstec OMT 2000 x 4) wurde z.B. bei 8 mW Schreibleistung und einfacher Schreibgeschwindigkeit (1,4 m/s) beim Auslesen der Information eine Modulationshöhe von 32 % (30 % bis 70 % ist CD-R Spezifikation) für das 3T Signal und 67 % (> 60% ist CD-R Spezifikation) für das 11T Signal erhalten.

25

- 30 -

Beispiel 25

5

10

Es wurde bei Raumtemperatur eine 2% Lösung des Co-Phthalocyanin Komplexes aus Beispiel 1 in 2,2,3,3-Tetrafluorpropanol hergestellt. Diese Lösung wurde mittels Spin Coating analog Beispiel 22 auf das Substrat aufgetragen und das Substrat analog Beispiel 20 mit einer Reflexions- und Schutzschicht versehen. In Abänderung zu Beispiel 20 wurden jedoch lediglich 50 nm Ag als Reflexionsschicht aufgetragen. Mit einem kommerziellen Testschreiber für CD-R (Pulstec OMT 2000 x 4) wurde z.B. bei 12 mW Schreibleistung und einfacher Schreibgeschwindigkeit (1.4 m/s) beim Auslesen der Information eine Modulationshöhe von 34% (30% bis 70% ist CD-R Spezifikation) für das 3T Signal und 62% (> 60% ist CD-R Spezifikation) für das 11T Signal erhalten.

5

10

15

20

25

Patentansprüche

1. Optischer Datenträger enthaltend ein transparentes Substrat auf dessen Oberfläche eine mit Licht beschreibbare Informationsschicht und gegebenenfalls
eine Reflektionsschicht, gegebenenfalls Zwischenschichten und/oder gegebenenfalls eine Schutzschicht aufgebracht ist, dadurch gekennzeichnet, dass
die mit Licht beschreibbare Informationsschichtschicht wenigstens einen CoPhthalocyaninfarbstoff der allgemeinen Formel I enthält

worin

CoPc für Kobalt-(III)-Phthalocyanin steht, wobei L¹ und L² axiale, koordinativ gebundene Liganden des Kobalt-Zentralatoms sind und die Reste R³ bis R⁶ Substituenten des Phthalocyanins entsprechen, worin

R⁰, R¹ und R² unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Cycloalkyl, Alkenyl, Aryl oder Hetaryl stehen oder zwei der Reste R⁰ bis R² zusammen mit dem N-Atom, an das sie gebunden sind einen hydrierten, teilhydrierten, quasiaromatischen oder aromatischen Ring bilden, vorzugsweise einen 5- bis 7-gliedrigen Ring bilden, der gegebenenfalls weitere Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe N, O und/oder S enthält,

5

10

15

20

25

30

R für Alkyl, Cycloalkyl, Alkenyl, Aryl oder Hetaryl steht,

R³, R⁴, R⁵ und R⁶ unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Alkyl, Aryl, Alkylamino, Dialkylamino, Alkoxy, Aryloxy, Arylthio, Alkylthio, SO₃H, SO₂NR⁷R⁸ CO₂R¹², CONR⁷R⁸, NH-COR¹² oder einen Rest $-(B)_{m}$ -D stehen,

 \mathbf{B} ein Brückenglied aus der Gruppe direkte Bindung, CH2, CO, CH(Alkyl), C(Alkyl)2, NH, S, O oder -CH=CH- bedeutet, wobei (B)m eine chemisch sinnvolle Kombination von Brückengliedern B bedeutet und m für 1 bis 10 steht, vorzugsweise ist m = 1,

D für den monovalenten Rest eines Redoxsystems der Formel

$$X^{1}$$
 (Red)

oder

oder für einen Metallocenylrest oder Metallocenylcarbonylrest steht, wobei als Metallzentrum Titan, Mangan, Eisen, Ruthenium oder Osmium in Frage kommt,

X¹ und X² unabhängig voneinander für NR'R", OR" oder SR" stehen,

 Y^1 für NR', O oder S steht,

> Y^2 für NR' steht,

für 1 bis 10 steht und n

R' und R" unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Cycloalkyl, Aryl oder Hetaryl stehen oder eine direkte Bindung oder eine Brücke zu einem der C-Atome der — CH—CH—n bzw. — CH—CH—n Kette bilden,

5

w, x, y und z unabhängig voneinander für 0 bis 12 stehen und w $+x+y+z \le 12$ sind,

10

R⁷ und R⁸ unabhängig voneinander für Alkylamino, Hydroxyalkylamin, Dialkylamino, Bishydroxyalkylamino, Arylamino oder R⁷ und R⁸ gemeinsam mit dem N-Atom, an das sie gebunden sind, einen heterocyclischen 5-, 6- oder 7-gliedrigen Ring bilden, gegebenenfalls unter Beteiligung weiterer Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe O, N und S, wobei NR⁷R⁸ insbesondere für Pyrrolidino, Piperidino oder Morpholino steht, und

15

R¹² für Alkyl, Aryl, Hetaryl oder Wasserstoff steht,

20

An für ein Anion steht.

2. Optischer Datenträger gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht wenigstens ein Co-Phthalocyanin-Komplex der Formel I enthalten ist, worin für die Reste R⁰ bis R⁸, R, R', R'', R¹² sowie für die Liganden L¹ und L²:

25

Substituenten mit der Bezeichnung "Alkyl" C₁-C₁₆-Alkyl, insbesondere C₁-C₆-Alkyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom, Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C₁-C₆-Alkoxy substituiert sind,

die Substituenten mit der Bezeichnung "Alkoxy" C₁-C₁₆-Alkoxy, insbesondere C₁-C₆-Alkoxy bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom, Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C₁-C₆-Alkyl substituiert sind,

5

Substituenten mit der Bezeichnung "Cycloalkyl" vorzugsweise C₄-C₈-Cycloalkyl, insbesondere C₅ bis C₆-Cycloalkyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom oder Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C₁-C₆-Alkyl substituiert sind,

10

Substituenten mit der Bezeichnung "Alkenyl" vorzugsweise C_6 - C_8 -Alkenyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom oder Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C_1 - C_6 -Alkyl substituiert sind, insbesondere bedeutet Alkenyl Allyl,

15

Substituenten mit der Bedeutung "Hetaryl" vorzugsweise für heterocyclische Reste mit 5- bis 7-gliedrigen Ringen, die vorzugsweise Heteroatome aus der Gruppe N, S und/oder O enthalten und gegebenenfalls mit aromatischen Ringen anelliert sind oder gegebenenfalls weitere Substituenten tragen beispielsweise Halogen, Hydroxy, Cyano und/oder Alkyl, wobei besonders bevorzugt sind: Pyridyl, Furyl, Thienyl, Oxazolyl, Thiazolyl, Imidazolyl, Chinolyl, Benzoxazolyl, Benzthiazolyl und Benzimidazolyl,

20

25

die Substituenten mit der Bezeichnung "Aryl" C₆-C₁₀-Aryl, vorzugsweise Phenyl oder Naphthyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie F, Cl, Hydroxy, C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Alkoxy, NO₂ und/oder CN substituiert sind.

3. Optische Datenträger gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass der CoPc-Komplex der Formel I dem der Formel Ib entspricht

5

worin die Substituenten die Bedeutung gemäß Anspruch 1 haben.

4. Optische Datenträger gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht wenigstens ein Co-Phthalocyanin-Komplex der Formel I enthalten ist, worin

15

10

20

25

L¹ und L² unabhängig voneinander für Ammoniak, Methylamin, Ethylamin, Ethanolamin, Propylamin, Isopropylamin, Butylamin, Isobutylamin, tert.-Butylamin, Pentylamin, tert.-Amylamin, Benzylamin, Methylphenylhexylamin, Aminopropylamin, Aminoethylamin, 3-Dimethylaminopropylamin, 3-Diethylaminopropylamin, Diethylaminoethylamin, Dibutylaminpropylamin, Morpholinopropylamin, Piperidinopropylamin, Pyrrolidinopropylamin, Pyrrolidonopropylamin, (Methyl-Hydroxyethylamino)propylamin, Methoxyethylamin, Ethoxyethylamin, Methoxypropylamin, Ethoxypropylamin, Methoxyethoxypropylamin, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylamin, Isopropyloxyisopropylamin, Dimethylamin, Diethylamin, Dipropylamin, Diisopropylamin, Diisobutylamin, Di-tert. Butylamin, Dipentylamin, Di-tert. Amylamin, Bis(2-Ethylhexyl)amin, Bis(aminopropyl)amin, Bis(aminoethyl)amin, Bis(3-dimethylaminopropyl)amin, Bis(3-Diethylaminopropyl)amin, Bis(diethylaminoethyl)amin, Bis(dibutylaminpropyl)amin, Di(morpholinopropyl)amin, Di(piperidinopropyl)amin, Di-(pyrrolidinopropyl)amin, Di(pyrrolidonopropyl)amin, Bis(3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propyl)amin, Dimethoxyethylamin, Diethoxy-

Bis(dibutylaminpro-

ethylamin, Dimethoxypropylamin, Diethoxypropylamin, Di(methoxyethoxyethyl)amin, Di(methoxyethoxypropyl)amin, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amin, Di(isopropyloxyisopropyl)amin, Tripropylamin, Tri(methoxyethoxyethyl)amin, Tri(methoxyethoxypropyl)amin, Diethylaminoethylpiperazin, Dipropylaminoethylpiperazin, Morpholin, Piperidin, Piperazin, Pyridylamin, 2-Thiazolylamin, 2-Benzthiazolylamin, 2-Benzoxazolylamin, 3-Iminoisoindoleninylamin, Pyridin, Propylpyridin, Butylpyridin, 2,2-Bipyridin, 4,4-Bipyridin, Pyridazin, Pyrimidin, Pyrazin, Imidazol, Benzimidazol, Isoxazol, Benzisoxazol, Oxazol, Benzoxazol, Thiazol, Benzthiazol, Chinolin, Pyrrol, Indol, 3,3-Dimethylindol, Aminopyridino, Anilino, p-Toluidin, p-tert. Butylamino, p-Anisidin, Isopropylanilino, Butoxyanilino oder Naphthylamino stehen, oder

15

20

25

10

5

L¹ und L² unabhängig voneinander für Methylisonitril, Ethylisonitril, Ethanolisonitril, Propylisonitril, Isopropylisonitril, Butylisonitril, Isobutylisonitril, tert. Butylisonitril, Pentylisonitril, tert-Amylisonitril, Methylphenylhexylisonitril, Benzylisonitril, Aminopropylisonitril. Aminoethylisonitril. 3-Dimethylaminopropylisonitril, 3-Diethylaminopropylisonitril, Diethylaminoethylisonitril, Dibutylaminpropylisonitril, Morpholinopropylisonitril, Piperidinopropylisonitril, Pyrrolidinopropylisonitril, Pyrrolidonopropylisonitril, 3-(Methyl-hydroxyethylamino)propylisonitril, Methoxyethylisonitril, Ethoxyethylisonitril, Methoxypropylisonitril, Ethoxypropylisonitril, Methoxyethoxypropylisonitril, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylisonitril, Isopropyloxyisopropylisonitril, Dimethylisonitril, Diethylisonitril, Diethanolisonitril, Dipropylisonitril, Diisopropylisonitril, Dibutylisonitril, Diisobutylisonitril, Di-tert.-butylisonitril, Dipentylisonitril, Di-tert.-amylisonitril, Bis(2-Ethylhexyl)isonitril, Bis(aminoethyl) isonitril, Bis(aminopropyl)isonitril, Bis(dimethylaminopropyl)isonitril, Bis(diethylaminopro-

Bis(diethylaminoethyl)isonitril,

30

pyl)isonitril,

nylisonitril oder Naphtylisonitril stehen,

nitril, Di(pyrrolidinopropyl)isonitril, Di(pyrrolidonopropyl)isonitril, Bis(3-(Methyl-hydroxyethylamino)propyl)isonitril, Dimethoxyethyl-isonitril, Diethoxyethylisonitril, Dimethoxyethoxy-propylisonitril, Di(methoxyethoxyethyl)isonitril, Di(methoxyethoxy-propyl)isonitril, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)isonitril, Di(isopropyloxyisopropyl)isonitril, Tri(methoxyethoxyethyl)isonitril, Tri(methoxyethoxyethyl)isonitril, Tri(methoxyethoxyethyl)isonitril, Pyridylisonitril, 2-Thiazolylisonitril, 2-Benzthiazolylisonitril, 2-Benzoxazolylisonitril, 3-Iminoisoindoleninylisonitril, Phenylisonitril, p-tert.-Butylphenylisonitril, p-Methoxyphenylisonitril, Isopropylphenylisonitril, Butoxyphenylisonitril, Butoxyphenyliso

pyl)isonitril, Di(morpholinopropyl)isonitril, Di(piperidinopropyl) iso-

15

10

5

20

25

30

R³, R⁴, R⁵ und R⁶ unabhängig voneinander für Chlor, Fluor, Brom, Iod, Cyano, Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, tert. Butyl, Pentyl, tert. Amyl, Hydroxyethyl, 3-Dimethylaminopropyl, 3-Diethylaminopropyl, Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopropylphenyl, Trifluormethylphenyl, Naphthyl, Methylamino, Ethylamino, Propylamino, Isopropylamino, Butylamino, Isobutylamino, tert. Butylamino, Pentylamino, tert. Amylamino, Benzylamino, Methylphenylhexylamino, Hydroxyethylamino, Aminopropylamino, Aminoethylamino, 3-Dimethylaminopropylamino, 3-Diethylaminopropylamino, Diethylaminoethylamino, Dibutylaminpropylamino, Morpholinopropylamino, Piperidinopropylamino, Pyrrolidinopropylamino, Pyrrolidonopropylamino, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propylamino, Methoxyethylamino, Ethoxyethylamino, Methoxypropylamino, Ethoxypropylamino, Methoxyethoxypropylamino, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylamino, Isopropyloxypropylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Diethanolamino, Dipropylamino, Diisopropylamino, Dibutylamino, Diisobutylamino, Di-tert. butylamino, Dipentylamino, Di-tert. amylamino, Bis(2-Ethylhexyl)amino, Bis(aminopropyl)amino, 5

10

15

Bis(aminoethyl)amino, Bis(3-Dimethylaminopropyl)amino, diethylaminopropyl)amino, Bis(diethylaminoethyl)amino, Bis(dibutylaminpropyl)amino, Di(morpholinopropyl)amino, Di(piperidinopropyl)amino, Di(pyrrolidinopropyl)amino, Di(pyrrolidonopropyl)amino. Bis(3-(methyl-hydroxyethylamino)propyl)amino, Dimethoxyethylamino, Diethoxyethylamino, Dimethoxypropylamino, Diethoxypropylamino, Di(methoxyethoxyethyl)amino, Di(methoxyethoxypropyl)amino, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Di(isopropyloxyisopropyl)amino, Methoxy, Ethoxy, Propyloxy, Isopropyloxy, Butyloxy, Isobutyloxy, tert.- Butyloxy, Pentyloxy, tert. Amyloxy, Methoxyethoxy, Ethoxyethoxy, Methoxypropyloxy, Ethoxypropyloxy. Methoxyethoxypropyloxy, 3-(2-Ethylhexyloxy)propyloxy, Phenyl, Methylthio, Ethylthio, Propylthio, Isopropylthio, Butylthio, Isobutylthio, tert.-Butylthio, Pentylthio, tert.-Amylthio, Methoxyphenyl, Trifluormethylphenyl, Naphthyl, CO₂R¹², CONR⁷R⁸, NH-COR¹², SO₃H, SO₂NR⁷R⁸ oder für einen Rest der Formel

$$(B)_{\overline{m}} \longrightarrow (B)_{\overline{m}} \longrightarrow (B)_{\overline{m}} \longrightarrow (CO)_{\overline{m}} \longrightarrow (CO$$

20 worin

wobei der Stern (*), die Anknüpfung mit dem 5-Ring anzeigt,

w, x, y und z unabhängig voneinander für 0 bis 8 stehen und w+x+y+z \leq 12 sind,

An für Chlorid, Bromid, Fluorid, C₁- bis C₂₀-AlkylCOO, Formiat, Oxalat, Lactat, Glycolat, Citrat, CH₃OSO₃, NH₂SO₃, CH₃SO₃, ½ SO₄²- oder 1/3 PO₄³- steht,

NR⁷R⁸ für Amino, Methylamino, Ethylamino, Propylamino, Isopropylamino, Butylamino, Isobutylamino, tert. Butylamino, Pentylamino, tert. Amylamino, Benzylamino, Methylphenylhexylamino, 2-Ethyl-1hexylamino, Hydroxyethylamino, Aminopropylamino, Aminoethylamino, 3-Dimethylaminopropylamino, 3-Diethylaminopropylamino, Morpholinopropylamino, Piperidinopropylamino, Pyrrolidinopropylamino, Pyrrolidonopropylamino, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propylamino, Methoxyethylamino, Ethoxyethylamino, Methoxypropylamino, Ethoxypropylamino, Methoxyethoxypropylamino, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylamino, Isopropyloxyisopropylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Dipropylamino, Diisopropylamino, Dibutylamino, Diisobutylamino, Di-tert. butylamino, Dipentylamino, Di-tert. amylamino, Bis(2-Ethylhexyl)amino, Dihydroxyethylamino, Bis(aminopropyl)amino, Bis(aminoethyl)amino, Bis(3-dimethylaminopropyl)amino, Bis(3-diethylaminopropyl)amino, Di(morpholinopropyl)ami-Di(piperidinopropyl)amino, Di(pyrrolidinopropyl)amino, Di-(pyrrolidonopropyl)amino, Bis(3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propyl)amino, Dimethoxyethylamino, Diethoxyethylamino, Dimethoxypropylamino, Diethoxypropylamino, Di(methoxyethoxypropyl)amino, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Di(isopropyloxvisopropyl)amino, Anilino, p-Toluidino, p-tert. Butylanilino, p-Anisidino, Isopropylanilino, Naphthylamino stehen oder NR⁷R⁸ stehen, insbesondere für Pyrrolidino, Piperidino, Piperazino oder Morpholino stehen,

10

5

15

20

25

WO 02/25205

- 40 -

PCT/EP01/10427

R¹² für Wasserstoff, Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, tert.-Butyl, Pentyl, tert.-Amyl, Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopropylphenyl, p-Trifluormethylphenyl, Cyanophenyl, Naphthyl, 4-Pyridinyl, 2-Pyridinyl, 2-Chinolinyl, 2-Pyrrolyl oder 2-Indolyl steht,

wobei

ausbilden können.

die Alkyl-, Alkoxy-, Aryl- und heterocyclischen Reste gegebenenfalls weitere Reste wie Alkyl, Halogen, Hydroxy, Hydroxyalkyl, Amino, Alkylamino, Dialkylamino, Nitro, Cyano, CO-NH₂, Alkoxy, Alkoxycarbonyl, Morpholino, Piperidino, Pyrrolidino, Pyrrolidono, Trialkylsilyl, Trialkylsiloxy oder Phenyl tragen können, die Alkyl- und/oder Alkoxyreste gesättigt, ungesättigt, geradkettig oder verzweigt sein können, die Alkylreste teil- oder perhalogeniert sein können, die Alkyl- und/oder Alkoxyreste ethoxyliert oder propoxyliert oder silyliert sein können, benachbarte Alkyl und/oder Alkoxyreste an Aryl- oder heterocyclischen Resten gemeinsam eine drei- oder viergliedrige Brücke

20

25

30

- 5. Optische Datenträger gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass die mit Licht beschreibbare Informationsschicht zusätzlich ein von (I) verschiedenes metallhaltiges oder metallfreies Phthalocyanin enthält, wobei das Zentralatom ausgewählt wird aus den Gruppen: Si, Zn, Al, Cu, Pd, Pt, AU und Ag, insbesondere Cu oder Pd.
- 6. Optische Datenträger mit einer beschriebenen Informationsschicht, erhältlich dadurch, dass der optische Datenträger gemäß Anspruch 1 mit Licht einer Wellenlänge von 700 bis 830 nm beschrieben wurde.

5

15

20

25

- 7. Verfahren zur Herstellung der optischen Datenträger gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass man auf ein transparentes Substat die mit Licht beschreibbare Informationsschicht durch Beschichten mit dem Co-Phthalocyanin-Komplex der Formel I, gegebenenfalls in Kombination mit geeigneten Bindern, Additiven und geeigneten Lösungsmitteln, aufbringt und gegebenenfalls weiter mit einer Reflexionsschicht, gegebenenfalls weiteren Zwischenschichten und gegebenenfalls einer Schutzschicht versieht.
- 8. Verwendung von Co-Phthalocyanin-Komplexen der Formel (I) als lichtab-10 sorbierende Verbindungen in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht von optischen Datenspeichern.
 - 9. Verbindungen der Formel Ic

$$H_2NR^2$$
 $Co^{\bigoplus}Pc(SO_2NR^7R^8)$
 H_2NR^2
(Halogen)₀₋₁₀ (Alkoxy)₀₋₄ An G
(Ic)

worin

Halogen für Chlor, Brom oder Fluor steht,

 $R^7\,\mathrm{und}\,R^8$ unabhängig voneinander die Bedeutung gemäß $R^7\,\mathrm{und}\,R^8$ in Anspruch 1 besitzen,

- Alkoxy für C₁-C₆-Alkoxy steht, das gegebenenfalls substituiert ist und Co⊕Pc, An⊖, L¹und L² die in Anspruch 1 angegebene Bedeutung besitzen.
- 10. Verfahren zur Herstellung der Verbindung gemäß Anspruch 9, dadurch gekennzeichnet, dass man ein mit Sulfonamidgruppen der Formel SO₂NR⁷R⁸

WO 02/25205 PCT/EP01/10427

- 42 -

substituiertes, wobei R^7 und R^8 die oben genannte Bedeutung haben, und gegebenenfalls Halogen- und/oder Alkoxy-substituiertes Co-Phthalocyanin oxidiert und mit Aminen L^1 und L^2 umsetzt.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Inter | Application No PCT/EP 01/10427

		LL	
a. CLASSII IPC 7	FICATION OF SUBJECT MATTER G11B7/24 C09B47/0	8 C09B47/26	C01G51/00
According to	International Patent Classification (IPC) or to both national classification	ation and IPC	
B. FIELDS	SEARCHED		
Minimum do IPC 7	cumentation searched (classification system followed by classification ${\tt G11B} {\tt C09B} {\tt C07D} {\tt C01G}$	on symbols)	
	ion searched other than minimum documentation to the extent that s		
Electronic da	ata base consulted during the international search (name of data bas	se and, where practical, search to	erms used)
EPO-In	ternal		
C. DOCUME	ENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category °	Citation of document, with indication, where appropriate, of the rele	evant passages	Relevant to claim No.
Α	US 5 820 962 A (OGAWA TADASHI ET 13 October 1998 (1998-10-13) column 1, line 5 -column 6, line		1-8
A	EP 0 519 395 A (EASTMAN KODAK CO) 23 December 1992 (1992-12-23) cited in the application page 2, line 1 -page 3, line 57		1-8
	-	-/	
X Furth	ner documents are listed in the continuation of box C.	χ Patent family members	are listed in annex.
 Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier document but published on or after the international filing date "L' document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone document is combined with one or more other such document is combined with one or more other such document is combined with one or more other such document is combined with one or more other such document is combined with one or more other such document is combined with one or more other such document is combined with one or more other such document is combined with one or more other such document is combined with one or more other such document is combination being obvious to a person skilled in the art. "2" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such document is combined with one or more other such document is combined with one or more other such document is combined with one or more other such document is combined with one or more other such document is always. 			
	actual completion of the international search December 2001	Date of mailing of the internation $\frac{12/12/2001}{12/12/2001}$	ational search report
Name and r	nalling address of the ISA European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL – 2280 HV Rijswijk Tel. (+31–70) 340–2040, Tx. 31 651 epo nl, Fax: (+31–70) 340–3016	Authorized officer Lindner, T	

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Inte 1 1 Application No
PCT/EP 01/10427

A (A		PC1/EP 01/1042/
C.(Continu Category °	ation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
- Jalegory	Orlation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	netevant to craim No.
Υ	YAHYA H K ET AL: "SYNTHESIS OF SOME COBALT PHTHALOCYANINE-3,3',3,3'-TETRASULPHONAMIDE S AND SPECTROSCOPIC STUDIES OF THEIR APPLICATION TO CELLULOSIC FIBRES" JOURNAL OF THE SOCIETY OF DYERS AND COLOURISTS, SOCIETY OF DYERS AND COLOURISTS. BRADFORD, GB, vol. 104, no. 11, 1 November 1988 (1988-11-01), pages 432-434, XP000025874 ISSN: 0037-9859 * Section Experimental *	9,10
Υ	US 2 756 119 A (FRITZ BAUMANN ET AL) 24 July 1956 (1956-07-24) claim 1; examples 1-5	9,10
Υ	DE 15 69 753 A (FARBENFABRIKEN BAYER AG) 3 December 1970 (1970-12-03) page 1, line 1 -page 6, line 3 claims 1-9	9,10

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent ramily members

Inter al Application No
PCT/EP 01/10427

Patent document cited in search report		Publication date		Patent family member(s)	Publication date
US 5820962	A	13-10-1998	AU	1172797 A	17-07-1997
			CN	1169128 A ,B	31-12-1997
			DE	69612189 D1	26-04-2001
			DE	69612189 T2	19-07-2001
			ΕP	0811506 A1	10-12-1997
			WO	9723354 A1	03-07-1997
EP 0519395	Α	23-12-1992	US	5248538 A	28-09-1993
			CA	2070347 A1	19-12-1992
			DE	69223089 D1	18-12-1997
			DE	69223089 T2	10-06-1998
			EP	0519395 A1	23-12-1992
			JP	5185735 A	27-07-1993
US 2756119	Α	24-07-1956	NONE		
DE 1569753	Α	03-12-1970	BE	720210 A	03-02-1969
			СН	580675 A5	15-10-1976
			CH	514656 A	31-10-1971
			DE	1569753 A1	03-12-1970
			ES	357755 A1	16-03-1970
			FR	1580612 A	05-09-1969
			GB	1198954 A	15-07-1970
			NL	6812407 A	04-03-1969
			US	3636040 A	18-01-1972

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Inter nales Aktenzeichen PCT/EP 01/10427

A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES IPK 7 G11B7/24 C09B47/04 C09B47/08 C09B47/26 CO1G51/00 Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPK) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPK **B. RECHERCHIERTE GEBIETE** Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole) G11B C09B C07D C01G Recherchierte aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe) EPO-Internal C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN Betr. Anspruch Nr. Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile Kategorie® 1-8 Α US 5 820 962 A (OGAWA TADASHI ET AL) 13. Oktober 1998 (1998-10-13) Spalte 1, Zeile 5 -Spalte 6, Zeile 8 EP 0 519 395 A (EASTMAN KODAK CO) 1-8 Α 23. Dezember 1992 (1992-12-23) in der Anmeldung erwähnt Seite 2, Zeile 1 -Seite 3, Zeile 57 Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu Siehe Anhang Patentfamilie Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen "A" Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definierl, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist Erfindung zugrundellegenden Prinzips oder der ihr zugrundellegenden Theorie angegeben ist "E" älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist "X" Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden "L" Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zwelfelhaft er-scheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt) O* Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht
 P* Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist *&* Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist Datum des Abschlusses der internationalen Recherche Absendedatum des internationalen Recherchenberichts 12/12/2001 4. Dezember 2001 Bevollmächtigter Bediensteter Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL – 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl, Fax: (+31-70) 340-3016 Lindner, T

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Inter ales Aktenzeichen
PCT/EP 01/10427

Kategorie	ung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
Y	YAHYA H K ET AL: "SYNTHESIS OF SOME COBALT PHTHALOCYANINE-3,3',3,3'-TETRASULPHONAMIDE S AND SPECTROSCOPIC STUDIES OF THEIR APPLICATION TO CELLULOSIC FIBRES" JOURNAL OF THE SOCIETY OF DYERS AND COLOURISTS, SOCIETY OF DYERS AND COLOURISTS. BRADFORD, GB, Bd. 104, Nr. 11, 1. November 1988 (1988-11-01), Seiten 432-434, XP000025874 ISSN: 0037-9859 * Section Experimental *	9,10
Υ	US 2 756 119 A (FRITZ BAUMANN ET AL) 24. Juli 1956 (1956-07-24) Anspruch 1; Beispiele 1-5	9,10
Y	DE 15 69 753 A (FARBENFABRIKEN BAYER AG) 3. Dezember 1970 (1970-12-03) Seite 1, Zeile 1 -Seite 6, Zeile 3 Ansprüche 1-9	9,10

INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Inte es Aklenzeichen
PCT/EP 01/10427

Im Recherch angeführtes Pat		Datum der Veröffentlichung		Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
US 5820	962 A	13-10-1998	AU CN DE DE EP WO	1172797 A 1169128 A ,B 69612189 D1 69612189 T2 0811506 A1 9723354 A1	17-07-1997 31-12-1997 26-04-2001 19-07-2001 10-12-1997 03-07-1997
EP 0519	395 A	23-12-1992	US CA DE DE EP JP	5248538 A 2070347 A1 69223089 D1 69223089 T2 0519395 A1 5185735 A	28-09-1993 19-12-1992 18-12-1997 10-06-1998 23-12-1992 27-07-1993
US 2756	119 A	24-07-1956	KEINE		
DE 1569	753 A	03-12-1970	BE CH CH DE ES FR GB NL US	720210 A 580675 A5 514656 A 1569753 A1 357755 A1 1580612 A 1198954 A 6812407 A 3636040 A	03-02-1969 15-10-1976 31-10-1971 03-12-1970 16-03-1970 05-09-1969 15-07-1970 04-03-1969 18-01-1972

DERWENT-ACC-NO: 2002-454423

DERWENT-WEEK: 200663

COPYRIGHT 2008 DERWENT INFORMATION LTD

TITLE: New cobalt (III) phthalocyanine

compounds are useful as light absorbing

compounds for optical data storage

INVENTOR: BERNETH H; BIERINGER T ; BRUDER F ; BRUDER F

K ; HAGEN R ; HASSENRUCK K ; HASSENRUECK K ; KOSTROMINE S ; OSER R ; STAWITZ J ; STAWITZ J

W

PATENT-ASSIGNEE: BAYER AG[FARB]

PRIORITY-DATA: 2001DE-1024585 (May 21, 2001) , 2000DE-

1046771 (September 21, 2000) , 2001DE-

1015227 (March 28, 2001)

PATENT-FAMILY:

PUB-NO	PUB-DATE	LANGUAGE
WO 0225205 A1	March 28, 2002	DE
DE 10124585 A1	May 2, 2002	DE
AU 200185943 A	April 2, 2002	EN
EP 1322906 A1	July 2, 2003	DE
CZ 200300832 A3	June 18, 2003	CS
KR 2003034197 A	May 1, 2003	KO
CN 1462358 A	December 17, 2003	ZH
JP 2004509377 W	March 25, 2004	JA
IN 200600023 P3	September 1, 2006	EN

APPLICATION-DATA:

PUB-NO	APPL- DESCRIPTOR	APPL-NO	APPL-DATE
WO2002025205A1	N/A	2001WO- EP10427	September 10, 2001
DE 10124585A1	N/A	2001DE- 1024585	May 21, 2001
AU 200185943A	N/A	2001AU- 085943	September 10, 2001
CN 1462358A	N/A	2001CN- 816124	September 10, 2001
EP 1322906A1	N/A	2001EP- 965272	September 10, 2001
EP 1322906A1	N/A	2001WO- EP10427	September 10, 2001
CZ 200300832A3	N/A	2001WO- EP10427	September 10, 2001
JP2004509377W	N/A	2001WO- EP10427	September 10, 2001
IN 200600023P3	N/A	2001WO- EP10427	September 10, 2001
JP2004509377W	N/A	2002JP- 528765	September 10, 2001

CZ 200300832A3	N/A	2003CZ-	September
		000832	10, 2001
KR2003034197A	N/A	2003KR- 704032	March 20, 2003
IN 200600023P3	Based on	2006IN- MN00023	January 5, 2006

INT-CL-CURRENT:

TYPE	IPC DATE
CIPP	G03C1/67 20060101
CIPS	C07D217/14 20060101
CIPS	C07D221/04 20060101
CIPS	C07D311/12 20060101
CIPS	C07D311/80 20060101
CIPS	C07D455/04 20060101
CIPS	C07D491/04 20060101
CIPS	C07F15/06 20060101
CIPS	C09B23/01 20060101
CIPS	C09B23/04 20060101
CIPS	C09B23/10 20060101
CIPS	C09B29/00 20060101
CIPS	C09B29/036 20060101
CIPS	C09B29/36 20060101
CIPS	C09B44/10 20060101
CIPS	C09B47/04 20060101
CIPS	C09B47/08 20060101
CIPS	C09B47/26 20060101
CIPS	C09K9/02 20060101
CIPS	G03C1/76 20060101
CIPS	G11B7/0045 20060101
CIPS	G11B7/24 20060101
CIPS	G11B7/244 20060101

CIPS	G11B7/247	20060101
CIPS	G11B7/248	20060101
CIPS	G11B7/249	20060101
CIPS	G11B7/254	20060101
CIPS	G11B7/26 2	20060101

RELATED-ACC-NO: 2002-443989 2002-723712 2002-723713 2002-750654 2002-759972 2003-029981 2003-047022 2003-075580 2003-092862 2003-103287 2003-103420 2003-103421 2003-239071 2003-239072 2003-278721 2003-403037 2003-865063

ABSTRACTED-PUB-NO: WO 0225205 A1

BASIC-ABSTRACT:

NOVELTY - New cobalt (III) phthalocyanine compounds are claimed.

DESCRIPTION - Cobalt (III) phthalocyanine compounds of formula (1) are new.

Halogen = chlorine, bromine or fluorine;

R7, R8 = alkylamino, hydroxyalkylamino-, dialkylamino, bis hydroxyalkylamino, arylamino or R7 and R8 together with the N atom they are bonded to form a 5-7 membered ring, optionally containing other hetero atoms, preferably O, N and S whereby NR7R8 is preferably pyrrolidine, piperidine or morpholine;

alkoxy = 1-6C alkoxy, optionally substituted;

Co+Pc = cobalt (III) phthalocyanine;

L1, L2 = an amine, NROR1R2 or isonitrile of formula (2);

R0-R2=H, alkyl, cycloalkyl, alkenyl, aryl or heteroaryl or two of R0-R2 together with the N atom they are bonded to form an at least partially hydrogenated, quasiaromatic or aromatic ring, preferably 5-7 membered, optionally containing other hetero atoms, preferably N, O and/or S;

An-=anion.

INDEPENDENT CLAIMS are included for:

- (1) process for the production of compounds of formula
- (1) by oxidation of a cobalt-phthalocyanine, substituted wit SO2NR7R8 and optionally halogen and/or alkoxy, and reaction with amines L1 and L2;
- (2) optical data carrier comprising a transparent substrate having light-write-able information layer and optionally a reflective layer, optionally intermediate layers and/or optionally a protective layer whereby the information layer contains at least one cobalt-phthalocyanine dye of formula (3);
- (3) process for the production of the optical data carrier by coating the cobalt phthalocyanine complex of formula (3), optionally in combination with suitable binders additives and solvents onto a transparent substrate optionally followed by reflective layer, optionally other intermediate layers and optionally a protective layer.

R = alkyl, cycloalkyl, alkenyl, aryl or heteroaryl;

R3-R6 = halogen, cyano, nitro, alkyl, aryl, alkylamino, dialkylamino, alkoxy, alkylthio, aryoxy, arylthio, SO3H, SO2NR1R2, CO2R9, CONR1R2, NH-COR7 or -(B)m-D;

B = bridging member comprising a direct bond, CH2, CO, CH (alkyl), C(alkyl)2, NH, S, O or -CH=CH-;

m = 1-10 (1-4);

D = formula (4) or (5) or a metallocenyl or metallocenylcarbonyl having titanium, manganese, iron, ruthenium or osmium metal center;

X1, X2 = NR'R, OR or SR;

Y1 = NR1, O or S;

Y2 = NR1;

n = 1-10;

R',R = H, alkyl, cycloalkyl, aryl or heteroaryl or form a direct bond or a bridge to a C atom of a -(CH=CH)n- and/or =(CH-CH)n= chain;

w, x, y, z = 0-12;

w+x+y+z = greater than or equal to 12;

R7,R8 = alkylamino, hydroxyalkylamine, dialkylamine, bis hydroxyalkylamine, arylamine or R7 and R8 together with the N atom they are bonded to form a 5-7 membered heterocyclic ring, optionally containing other heteroatoms, preferably O, N or S, whereby NR7R8 is pyrrolidine, piperidine or morpholine;

R12 = alkyl, aryl, heteroaryl or H.

USE - The cobalt phthalocyanine complex of formula (3) is useful as a light absorbing compound for optical data storage (claimed).

ADVANTAGE - The cobalt phthalocyanine dye of formula (3) has good stability to light, satisfactory signal-to-noise ratio, high sensitivity and is applied to the substrate without damage.

EQUIVALENT-ABSTRACTS:

ORGANIC CHEMISTRY

Preferred Composition: The information layer also contains a metal free or metal containing phthalocyanine having a central metal of Si, Zn, Al, Cu, Pd, Pt, Au or Ag, (preferably Cu or Pd). The optical data carrier is write-able using light having a wave length of 700-830 nm.

Preferred Definitions:

L1 and L2 = ammonia, bis(aminopropyl)amine, naphthylamino, methylisonitrile, bis(diethylaminoethyl) isonitrile or naphthylisonitrile;

R3-R6 = chlorine, aminopropylamino, propyloxy or naphthyl;

w, x, y, z = 0-8;

w+x+y+z = greater than or equal to 12;

An- = chloride, formate or CH3SO3-;

NR7R8 = amino, dimethylamino or naphthylamino;

R12 = hydrogen isobutyl, p-trifluoromethylphenyl or 2-indolyl.

Cobalt phthalocyanine (115 g) in dry chlorobenzene (1L) was mixed with chlorine (16 g) for 0.5 h. Excess chlorine was removed with nitrogen and 3- (methylhydroxyethyl)propylamine (90 g) was added dropwise followed by heating at 90 degrees C for 0.5 h and cooling. The resulting dyestuff was washed (1L chlorobenzene, 1L water) and dried under vacuum to yield 156 g of the dyestuff of formula (6) having a max lambda value of 670 nm (NMP). (6)

TITLE-TERMS: NEW COBALT PHTHALOCYANINE COMPOUND USEFUL

LIGHT ABSORB OPTICAL DATA STORAGE

DERWENT-CLASS: A89 E23 G06 L03 P83

CPI-CODES: A12-L03C; E23-B; G06-B01; G06-D07; G06-

F05; L03-G04B;

CHEMICAL-CODES: Chemical Indexing M3 *13* Fragmentation

Code H1 H100 H103 H182 H4 H401 H481 H8 M210 M211 M273 M281 M312 M313 M321 M332 M342 M383 M392 M416 M620 M730 Specific

Compounds RA14Y6 Registry Numbers

254499

Chemical Indexing M3 *14* Fragmentation Code A429 A960 C710 D000 E350 M280 M320 M411 M511 M520 M530 M540 M630 M730 Ring Index Numbers 07541 Specific Compounds R01160 Registry Numbers 129562 130115

Chemical Indexing M3 *15* Fragmentation Code C017 C100 C810 M411 M781 Specific Compounds R01781 Registry Numbers 270

Chemical Indexing M4 *01* Fragmentation Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720 C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350 H100 H103 H182 H401 H481 M210 M211 M273 M280 M281 M312 M313 M320 M321 M332 M342 M383 M392 M411 M424 M510 M511 M520 M530 M540 M620 M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541 Specific Compounds RA773C Registry Numbers 547469

Chemical Indexing M4 *02* Fragmentation Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720 C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350 H100 H181 M225 M231 M273 M280 M281 M320

M411 M424 M510 M511 M520 M530 M540 M620 M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541 Specific Compounds RA773I Registry Numbers 547475

Chemical Indexing M4 *03* Fragmentation Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720 C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350 F014 F653 H100 H182 H201 M280 M313 M320 M321 M332 M342 M383 M391 M411 M424 M510 M511 M520 M521 M530 M540 M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541 Specific Compounds RA773M Registry Numbers 547479

Chemical Indexing M4 *04* Fragmentation Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720 C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350 H100 H103 H182 M210 M211 M273 M280 M282 M313 M320 M321 M332 M342 M383 M391 M411 M424 M510 M511 M520 M530 M540 M620 M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541 Specific Compounds RA773P Registry Numbers 547482

Chemical Indexing M4 *05* Fragmentation Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720 C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350 H100 H181 H581 M210 M212 M272 M280 M281 M313 M320 M321 M332 M342 M383 M391 M411 M424 M510 M511 M520 M530 M540 M620 M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541 Specific Compounds RA773S Registry Numbers 547485

Chemical Indexing M4 *06* Fragmentation Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720

C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350 H101 H182 H583 M280 M313 M320 M323 M331 M342 M383 M393 M411 M424 M510 M511 M520 M530 M540 M620 M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541 Specific Compounds RA773T Registry Numbers 547486

Chemical Indexing M4 *07* Fragmentation Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720 C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350 H100 H181 H401 H481 H589 M280 M313 M320 M323 M331 M342 M383 M393 M411 M424 M510 M511 M520 M530 M540 M620 M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541 Specific Compounds RA773U Registry Numbers 547487

Chemical Indexing M4 *08* Fragmentation Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720 C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350 H100 H181 H581 M220 M223 M232 M272 M280 M281 M313 M320 M321 M332 M342 M383 M391 M411 M424 M510 M511 M520 M530 M540 M620 M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541 Specific Compounds RA773V Registry Numbers 547489

Chemical Indexing M4 *09* Fragmentation Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720 C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350 F000 F521 M280 M320 M411 M424 M510 M511 M520 M521 M530 M540 M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541 Specific Compounds RA773X Registry Numbers 547491

Chemical Indexing M4 *10* Fragmentation Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720 C801 C803 C804 C805 C806 C807 D021 D029 E350 F000 F521 H543 H584 M210 M211 M272 M283 M312 M323 M332 M342 M383 M393 M411 M424 M510 M511 M520 M521 M530 M540 M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541 Specific Compounds RA773Y Registry Numbers 547492

Chemical Indexing M4 *11* Fragmentation Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720 C801 C803 C804 C805 C806 C807 D021 D029 E350 F000 F521 H543 M220 M221 M232 M272 M283 M320 M411 M424 M510 M511 M520 M521 M530 M540 M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541 Specific Compounds RA7740 Registry Numbers 547493

Chemical Indexing M4 *12* Fragmentation Code A427 A940 A960 C000 C017 C100 C101 C107 C316 C500 C710 C720 C801 C802 C803 C804 C805 C806 C807 D000 D021 D022 D023 D024 D025 D029 E350 F000 F019 F020 F021 F029 G010 G019 G020 G021 G029 G030 G039 G040 G050 G100 G111 G112 G113 G221 G299 G553 G563 H100 H101 H102 H103 H121 H141 H142 H143 H161 H181 H182 H183 H201 H202 H203 H211 H212 H213 H401 H402 H403 H404 H405 H481 H482 H483 H484 H498 H541 H542 H543 H581 H582 H583 H584 H594 H599 H600 H607 H608 H609 H641 H642 H643 H713 H716 H721 H722 H723 J011 J012 J013 J014 J131 J132 J133 J231 J232 J331 J332 J341 J342 K353 K399 K431 K499 L143 L199 L640 L660 L699 M112 M114 M119 M121 M122 M123 M124 M125 M126 M129 M136 M139 M141 M142 M143 M147 M149 M210 M211 M212 M213 M214 M215

M216 M220 M221 M222 M223 M224 M225 M226 M231 M232 M233 M240 M262 M271 M272 M273 M280 M281 M282 M283 M311 M312 M313 M314 M315 M316 M320 M321 M322 M323 M331 M332 M333 M340 M342 M349 M373 M381 M383 M391 M392 M393 M411 M424 M510 M511 M520 M521 M522 M523 M530 M531 M532 M533 M540 M541 M542 M543 M620 M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W031 W032 W033 W034 W326 W335 W336 Ring Index Numbers 07541 Markush Compounds 006384401

UNLINKED-DERWENT-REGISTRY-NUMBERS:

ENHANCED-POLYMER-INDEXING:

; 1160U ; 1160S ; 1781U ; 1781S

Polymer Index [1.1] 018; P0862 P0839 F41 F44 D01 D63;

Polymer Index [1.2]
018; ND01; Q9999
Q8924*R Q8855; B9999
B4397 B4240; K9870 K9847
K9790; K9847*R K9790;
N9999 N7034*R N7023;
N9999 N7090 N7034 N7023;
N9999 N7136 N7034 N7023;
B9999 B5414*R B5403
B5276; B9999 B5436 B5414
B5403 B5276; K9610
K9483; K9483*R; K9676*R;
K9712 K9676; K9701
K9676; N9999 N7329 N7078
N7034 N7023;

SECONDARY-ACC-NO:

CPI Secondary Accession Numbers: 2002-129157